

Od czasu odkrycia i zbadania grafenu, materiały dwuwymiarowe cieszą się niegasnącym zainteresowaniem badaczy, ze względu na ich doskonałe właściwości fizyczne, pozwalające na realizację nowych urządzeń optoelektronicznych. Do chwili obecnej wytworzono kilkaset materiałów dwuwymiarowych i wprowadza się je do powszechnego użytku. W ostatnich latach odkryta została nowa klasa materiałów dwuwymiarowych, będących jednocześnie półprzewodnikami oraz magnetykami. Ich istnienie jest zaskakujące, gdyż według wczesnych przewidywań teoretycznych stabilny porządek magnetyczny nie może być zrealizowany w dwóch wymiarach. Liczne eksperymenty obaliły tę tezę, a dwuwymiarowe półprzewodniki magnetyczne otworzyły nowe możliwości zastosowań w elektro-, opto- i spintronice. Mogą być one także składnikami syntetycznych heterostruktur warstwowych zawierających materiały dwuwymiarowe o różnych właściwościach. Z tych względów, badania pomiarowe i teoretyczne tych półprzewodników magnetycznych są obecnie bardzo pożądane.

Podstawową cechą materiałów magnetycznych, determinującą ich właściwości fizyczne, jest sposób uporządkowania momentów magnetycznych w sieci krystalicznej. Jednym ze sposobów jego badania są pomiary widm optycznych materiałów. Te z kolei wynikają z ich struktury elektronowej i ekscytonowej. Dotychczasowe eksperymenty i obliczenia teoretyczne wykazały istotną zależność widm optycznych od rodzaju porządku magnetycznego w dwuwymiarowych półprzewodnikach. Metodą dającą głębszy wgląd w te zależności są pomiary optyczne w silnym zewnętrznym polu magnetycznym. Energetyczne przesunięcia linii w widmach magnetoptycznych są opisywane tzw. g-czynnikami i współczynnikami diamagnetycznymi ekscytonów. Wartości tych parametrów mogą być precyzyjnie wyznaczone z obliczeń teoretycznych i posłużyć do identyfikacji rodzaju porządku magnetycznego w badanych materiałach oraz zrozumienia struktury i właściwości kompleksów ekscytonowych w nich występujących.

Niniejszy projekt ma na celu zbadanie właściwości magnetoptycznych wybranych dwuwymiarowych półprzewodników magnetycznych za pomocą nowoczesnych metod numerycznych fizyki kwantowej. Planuje się wykonanie obliczeń g-czynników i współczynników diamagnetycznych pojedynczych nośników ładunku oraz kompleksów ekscytonowych w wybranych związkach z rodzin di-, tri- i tetrachalkogenków metali przejściowych, metalo-chalkogeno-halidków oraz MA_2Z_4 , a także ich heterostruktur warstwowych, oraz ich zależności od rodzaju porządku magnetycznego, osi kwantyzacji momentów magnetycznych i reprezentacji korelacji elektronowych. Ponadto, zostaną wyznaczone energie wiązania ekscytonów i promienie Bohra, wspomagające dodatkowo interpretację danych pomiarowych.

Badania będą prowadzone w ramach teorii funkcjonału gęstości i równania Bethe-Salpetera, będące precyzyjnymi narzędziami obliczeń właściwości materiałów. W szczególności, do wyznaczenia g-czynników zostanie użyta metoda opracowana w ostatnich latach przez kierownika projektu, dająca doskonałą zgodność z wynikami pomiarów i obecnie powszechnie używana w środowisku badawczym. W ramach projektu zostaną także opracowane i rozwinięte narzędzia obliczeniowe pozwalające na automatyzację procesu obliczeń parametrów magnetoptycznych materiałów półprzewodnikowych.

Rezultaty projektu pozwolą na głębsze zrozumienie właściwości fizycznych dwuwymiarowych półprzewodników magnetycznych oraz wskazanie potencjalnych kandydatów do zastosowań technologicznych. W szczególności, wynikiem projektu będzie obszerny zbiór wartości parametrów magnetoptycznych rozległej klasy materiałów, istotnie wspomagający interpretację oraz planowanie badań eksperymentalnych w niedalekiej przyszłości. Opracowane i rozwinięte w ramach projektu narzędzia obliczeniowe będą przydatne dla szerokiej społeczności fizyków teoretycznych.